

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>2</b>
<b>1 Постановка задачи</b>	<b>2</b>
1.1 Структурно-вероятностное описание модельной структуры . . . . .	2
<b>2 Параметрическая идентификация моделей стохастических     непрерывно-дискретных систем</b>	<b>4</b>
2.1 Вычисление значения критерия идентификации . . . . .	5
2.2 Вычисление значения градиента критерия идентификации . . . . .	7
2.2.1 Вычисление по аналитическому выражению . . . . .	7
2.2.2 Программный метод автоматического дифференцирования	12
2.3 Программные аспекты реализации вычислений . . . . .	15
<b>3 Результаты экспериментальных модельных исследований</b>	<b>16</b>
3.1 Пример 1 . . . . .	16
3.2 Пример 2 . . . . .	17
3.3 Пример 3 . . . . .	19
3.4 Пример 4 . . . . .	21
3.5 Пример 5 . . . . .	22
<b>Заключение</b>	<b>24</b>
<b>Список литературы</b>	<b>24</b>
<b>Приложение А Исходные тексты</b>	<b>25</b>

# Введение

В настоящее время математическое моделирование играет фундаментальную роль в науке и технике и является одним из интенсивно развивающихся перспективных научных направлений в области информатики.

Проблема идентификации, связанная с построением математических моделей по экспериментальным данным, относится к одной из основных проблем теории и практики автоматического управления. Ее качественное решение способствует эффективному применению на практике современных математических методов и наукоемких технологий, например, при расчете и проектировании систем управления подвижными (в том числе авиационно-космическими) и технологическими объектами, построении прогнозирующих моделей (например, в экономике и бизнес-процессах), конструировании следящих и измерительных систем [1].

## 1. Постановка задачи

### 1.1 Структурно-вероятностное описание модельной структуры

Определим модель стохастической динамической линейной непрерывно-дискретной системы в пространстве состояний в общем виде:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = F\mathbf{x}(t) + C\mathbf{u}(t) + G\mathbf{w}(t), & t \in [t_0, T] \\ \mathbf{y}(t_k) = H\mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k), & k = 1, \dots, N \end{cases} \quad (1)$$

Здесь:

$\mathbf{x}(t)$  –  $n$ -вектор состояния;

$F$  – матрица перехода состояния;

$\mathbf{u}(t)$  –  $r$ -вектор управления (входного воздействия);

$C$  – матрица управления;

$\mathbf{w}(t)$  –  $p$ -вектор возмущений;

$G$  – матрица влияния возмущений;

$H$  – матрица наблюдения;

$\mathbf{v}(t_{k+1})$  –  $m$ -вектор шума измерений;

$\mathbf{y}(t_{k+1})$  –  $m$ -вектор наблюдений (измерений) отклика;

$F, C, G, H$  – матрицы соответствующих размеров.

Априорные предположения:

- $F$  устойчива;
- пары  $(F, C)$  и  $(F, G)$  управляемы;
- пара  $(F, H)$  – наблюдаема;
- случайные процессы  $\{\mathbf{w}(t), t \in [t_0, T]\}$  и  $\{\mathbf{v}(t_k), k = 1, 2, \dots, N\}$  являются стационарными белыми гауссовскими шумами, причем:

$$E[\mathbf{w}(t)] = 0, \quad E[\mathbf{w}(t)\mathbf{w}^T(\tau)] = Q\delta(t - \tau)$$

$$E[\mathbf{v}(t_k)] = 0, \quad E[\mathbf{v}(t_k)\mathbf{v}^T(t_j)] = R\delta_{k,j}$$

$$E[\mathbf{v}(t_k)\mathbf{w}^T(t)] = 0, \quad \forall t_k, t,$$

где  $\delta(t - \tau)$  – дельта-функция Дирака,  $\delta_{jk}$  – символ Кронекера;

- начальное состояние  $\mathbf{x}(t_0)$  имеет нормальное распределение с параметрами  $\bar{\mathbf{x}}(t_0)$  и  $P(t_0)$  и не коррелирует с  $\mathbf{w}(\mathbf{t})$  и  $\mathbf{v}_k$  при любых значениях  $t$  и  $k$ .

Будем считать, что подлежащие оцениванию параметры  $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_s)$  могут входить в элементы матриц  $F, C, G, H, Q, R, P(t_0)$  и в вектор  $\bar{\mathbf{x}}(t_0)$  в различных комбинациях.

В данной модели уравнение объекта является непрерывным, а уравнение наблюдений — дискретным. Такая модель является характерной для значительного множества прикладных задач.

Одной из целей исследований в рамках магистерской диссертации является разработка алгоритмов оценивания состояния и идентификации стохастической динамической непрерывно-дискретной модели вида (1).

Один из видимых путей решения задачи оценивания состояния такой системы является адаптация аналогичных алгоритмов, применимых к дискретным и непрерывным системам, к данному непрерывно-дискретному случаю.

Разрабатываемый алгоритм также должен оценивать вероятностные характеристики шумов объекта и измерений, потому как в реальных задачах вероятностные характеристики данных процессов неизвестны или же эти процессы являются нестационарными.

## **2. Параметрическая идентификация моделей стохастических непрерывно-дискретных систем**

Идентификацией динамической системы называется определение структуры и параметров математической модели, обеспечивающих наилучшее совпадение выходных переменных моделей переменных модели и системы при одинаковых входных воздействиях [2].

Под параметрической идентификацией, в частности, понимается только определение параметров модели. Предполагается, что структура модели известна.

В данной работе в качестве критерия идентификации используется критерий максимального правдоподобия, а получаемые оценки параметров модели являются оценками максимального правдоподобия (ОМП).

## 2.1 Вычисление значения критерия идентификации

Выражение для критерия максимального правдоподобия имеет вид [1]:

$$\begin{aligned}\chi(\theta) = -\ln L(Y_1^N; \theta) = \frac{Nm}{2} \ln 2\pi + \\ + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N [\varepsilon^T(t_k, \theta) B^{-1}(t_k, \theta) \varepsilon(t_k, \theta) + \ln \det B(t_k, \theta)] .\end{aligned}\tag{2}$$

Здесь:

$Y_1^N$  — множество из  $N$  наблюдений отклика

$\theta$  — вектор параметров модели

$\chi(\cdot)$  — функционал, используемый в качестве критерия идентификации

$L(\cdot)$  — функционал максимального правдоподобия

$N$  — число дискретных моментов времени наблюдений

$m$  — число выходных каналов системы (размерность вектора наблюдений отклика)

$\varepsilon(t_j) = y(t_j) - H\hat{x}(t_j|t_{j-1})$  — обновляющая последовательность

$B(t_j) = HP(t_j|t_{j-1})H^T + R$  — ковариационная обновляющей последовательности

Алгоритм вычисления значения критерия следующий:

1. Пусть  $j = 1$ ,  $\chi(\theta) = 0$ .
2. Решаются дифференциальные уравнения непрерывно-дискретного фильтра Калмана с соответствующими начальными условиями:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t|t_{j-1}) = F\hat{x}(t|t_{j-1}) + Cu(t), \quad t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad \hat{x}(t_0|t_0) = \bar{x}_0;$$

$$\frac{d}{dt}P(t_j|t_{j-1}) = FP(t_j|t_{j-1}) + P(t_j|t_{j-1})F^T + GQG^T,$$

$$t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad P(t_0|t_0) = P_0;$$

Получаем  $\hat{x}(t_j|t_{j-1})$  и  $P(t_j|t_{j-1})$ .

3. Вычисляются

$$\varepsilon(t_j) = y(t_j) - H\hat{x}(t_j|t_{j-1});$$

$$B(t_j) = HP(t_j|t_{j-1})H^T + R;$$

$$K(t_j) = P(t_j|t_{j-1})H^TB^{-1}(t_j).$$

4. Вычисляется соответствующая  $j$ -му моменту времени составляющая функции правдоподобия (2.35)

$$S = \frac{1}{2} [B^{-1}(t_j)\varepsilon(t_j) + \ln \det B(t_j)] .$$

5. Накапливается сумма

$$\chi(\theta) = \chi(\theta) + S.$$

6. Если  $j = N$ , то

$$\chi(\theta) = \chi(\theta) + \frac{Nm}{2} \ln 2\pi$$

и вычисления прекращаются, иначе — вычисляются следующие началь-

ные условия по формулам

$$\hat{x}(t_j|t_{j-1}) = \hat{x}(t_j|t_{j-1}) + K(t_j)\varepsilon(t_j);$$

$$P(t_j|t_{j-1}) = [I - K(t_j)H] P(t_j|t_{j-1}),$$

$j$  заменяется на  $j + 1$  и осуществляется переход на шаг 2.

## 2.2 Вычисление значения градиента критерия идентификации

В данной работе предлагается к рассмотрению два практических метода вычисления значения градиента критерия идентификации: по аналитическому выражению и с использованием программных средств автоматического дифференцирования.

Далее приведено краткое описание каждого из этих методов.

### 2.2.1 Вычисление по аналитическому выражению

Аналитическое выражение производных критерия следующее [1]:

$$\frac{\partial \chi(\theta)}{\partial \theta_k} = \sum_{j=1}^N \left[ \varepsilon^T(t_j) B^{-1}(t_j) \frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_k} - \frac{1}{2} \varepsilon^T(t_j) B^{-1}(t_j) \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} B^{-1}(t_j) \varepsilon(t_j) + \right. \\ \left. \frac{1}{2} \text{Sp} \left( B^{-1}(t_j) \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} \right) \right], \quad k = 1, \dots, s, \quad (3)$$

где  $s$  — размерность вектора неизвестных параметров  $\Theta$ .

В выражении (3) частные производные  $\frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_k}$  и  $\frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k}$  вычисляются с помощью следующим выражений:

$$\frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_k} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_k} \hat{x}(t_j|t_{j-1}) - H \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_k}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} = \frac{\partial H}{\partial \theta_k} P(t_j|t_{j-1}) H^T + H \frac{\partial P(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_k} H^T + H P(t_j|t_{j-1}) \frac{\partial H^T}{\partial \theta_k} + \frac{\partial R}{\partial \theta_k}. \quad (5)$$

Уравнения чувствительности для оценки вектора состояний:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{x}(t|t_{j-1}) \\ \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} F \hat{x}(t|t_{j-1}) + G u(t) \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_1} \hat{x}(t|t_{j-1}) + F \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} + \frac{\partial G}{\partial \theta_1} u(t) \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_s} \hat{x}(t|t_{j-1}) + F \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} + \frac{\partial G}{\partial \theta_s} u(t) \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} F & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_1} & F & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_s} & 0 & \cdots & F \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{x}(t|t_{j-1}) \\ \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \hat{x}(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} G \\ \frac{\partial G}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} u(t), \\ & t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad j = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (6)$$

Начальные условия:

- для  $j = 1$

$$\begin{bmatrix} \hat{x}(t_0|t_0) \\ \frac{\partial \hat{x}(t_0|t_0)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \hat{x}(t_0|t_0)}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \frac{\partial \overline{x_0}}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \overline{x_0}}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} \quad (7)$$

- для  $j = 2, 3, \dots, N$

$$\begin{bmatrix} \hat{x}(t_j|t_j) \\ \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_j)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_j)}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x}(t_j|t_{j-1}) + K(t_j) \varepsilon(t_j) \\ \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_1} + \frac{\partial K(t_j)}{\partial \theta_1} \varepsilon(t_j) + K(t_j) \frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_s} + \frac{\partial K(t_j)}{\partial \theta_s} \varepsilon(t_j) + K(t_j) \frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_s} \end{bmatrix}. \quad (8)$$



Уравнения чувствительности для ковариационной матрицы оценки вектора состояний:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} P(t|t_{j-1}) \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \\
& = \begin{bmatrix} FP(t|t_{j-1}) + P(t|t_{j-1})F^T + GQG^T \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_1}P(t|t_{j-1}) + F\frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} + \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1}F^T + \\ \quad + P(t|t_{j-1})\frac{\partial F^T}{\partial \theta_1} + \frac{\partial G}{\partial \theta_1}QG^T + G\frac{\partial Q}{\partial \theta_1}G^T + GQ\frac{\partial G^T}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_s}P(t|t_{j-1}) + F\frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} + \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s}F^T + \\ \quad + P(t|t_{j-1})\frac{\partial F^T}{\partial \theta_s} + \frac{\partial G}{\partial \theta_s}QG^T + G\frac{\partial Q}{\partial \theta_s}G^T + GQ\frac{\partial G^T}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \\
& = \begin{bmatrix} F & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_1} & F & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial \theta_s} & 0 & \cdots & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(t|t_{j-1}) \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} P(t|t_{j-1}) & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_1} & P(t|t_{j-1}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial P(t|t_{j-1})}{\partial \theta_s} & 0 & \cdots & P(t|t_{j-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F^T \\ \frac{\partial F^T}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F^T}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} + \\
& \quad + \begin{bmatrix} GQG^T \\ \frac{\partial G}{\partial \theta_1}QG^T \\ \vdots \\ \frac{\partial G}{\partial \theta_s}QG^T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ G\frac{\partial Q}{\partial \theta_1}G^T \\ \vdots \\ G\frac{\partial Q}{\partial \theta_s}G^T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ GQ\frac{\partial G^T}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ GQ\frac{\partial G^T}{\partial \theta_s} \end{bmatrix}, \\
& t_{j-1} \leq t \leq t_j, \quad j = 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{9}$$

Начальные условия:

- для  $j = 1$

$$\begin{bmatrix} P(t_0|t_0) \\ \frac{\partial P(t_0|t_0)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial P(t_0|t_0)}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_0 \\ \frac{\partial P_0}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial P_0}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} \quad (10)$$

- для  $j = 2, 3, \dots, N$

$$\begin{bmatrix} P(t|t_j) \\ \frac{\partial P(t|t_j)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial P(t|t_j)}{\partial \theta_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{I - K(t_j)H\} P(t_j|t_{j-1}) \\ \left[ -\frac{\partial K(t_j)}{\partial \theta_1} H - K(t_j) \frac{\partial H}{\partial \theta_1} \right] P(t_j|t_{j-1}) + \{I - K(t_j)H\} \frac{\partial P(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \left[ -\frac{\partial K(t_j)}{\partial \theta_s} H - K(t_j) \frac{\partial H}{\partial \theta_s} \right] P(t_j|t_{j-1}) + \{I - K(t_j)H\} \frac{\partial P(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_s} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial K(t_j)}{\partial \theta_k} = & \frac{\partial P(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_k} H^T B^{-1}(t_j) + P(t_j|t_{j-1}) \frac{\partial H^T}{\partial \theta_k} B^{-1}(t_j) - \\ & - P(t_j|t_j - 1) H^{-1} B^{-1}(t_j) \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} B^{-1}(t_j). \end{aligned} \quad (12)$$

Алгоритм может быть следующим:

1.  $j = 1$ ,  $\frac{\partial \chi(\theta)}{\partial \theta_k} = 0$ ,  $k = 1, \dots, s$ , где  $s$  — размерность вектора параметров  $\Theta$ .
2. Решаются уравнения чувствительности для оценки вектора состояния (6) и его ковариационной матрицы (9) с начальными условиями (7) и (10) соответственно. Получаем  $\hat{x}(t_j|t_{j-1})$  и  $P(t_j|t_{j-1})$ .

3. Вычисляются

$$B(t_j) = HP(t_j|t_{j-1})H^T + R;$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} = \frac{\partial H}{\partial \theta_k} P(t_j|t_{j-1})H^T + H \frac{\partial P(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_k} H^T + \\ + HP(t_j|t_{j-1}) \frac{\partial H^T}{\partial \theta_k} + \frac{\partial R}{\partial \theta_k}, \quad k = 1, \dots, s. \end{aligned} \quad (13)$$

4. Вычисляются

$$K(t_j) = P(t_j|t_{j-1})H^T B^{-1}(t_j);$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial K(t_k)}{\partial \theta_i} = \frac{\partial P(t_k|t_{k-1})}{\partial \theta_i} H^T B^{-1}(t_k) + P(t_k|t_{k-1}) \frac{\partial H^T}{\partial \theta_i} B^{-1}(t_k) - \\ - P(t_k|t_{k-1}) H^T B^{-1}(t_k) \frac{\partial B(t_k)}{\partial \theta_i} B^{-1}(t_k), \quad i = 1, \dots, s. \end{aligned} \quad (14)$$

5. Вычисляются

$$\begin{aligned} \varepsilon(t_j) = y(t_j) - H\hat{x}(t_j|t_{j-1}); \\ \frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_k} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_k} \hat{x}(t_j|t_{j-1}) - H \frac{\partial \hat{x}(t_j|t_{j-1})}{\partial \theta_k}, \quad k = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

6. Вычисляется соответствующая  $j$ -му моменту времени составляющая градиента функции правдоподобия (3)

$$\begin{aligned} S(k) = \varepsilon^T(t_j) B^{-1}(t_j) \frac{\partial \varepsilon(t_j)}{\partial \theta_k} - \frac{1}{2} \varepsilon^T(t_j) B^{-1}(t_j) \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k} B^{-1}(t_j) \varepsilon(t_j) + \\ + \frac{1}{2} \text{Sp } B^{-1}(t_j) \frac{\partial B(t_j)}{\partial \theta_k}, \quad k = 1, \dots, s. \end{aligned} \quad (15)$$

7. Накапливается сумма

$$\frac{\partial \chi(\theta)}{\partial \theta_k} = \frac{\partial \chi(\theta)}{\partial \theta_k} + S(k), \quad k = 1, \dots, s.$$

8. Если  $j = N$ , то вычисления прекращаются, иначе — вычисляются следу-

ющие начальные условия по формулам (8) и (11),  $j$  заменяется на  $j + 1$ , и осуществляется переход на шаг 2.

### 2.2.2 Программный метод автоматического дифференцирования

Рассматриваемый программный метод берет свое начало из задач машинного обучения глубоких нейронных сетей, которые в настоящее время являются популярным объектом научных исследований, образующие целое новое научное направление — глубинное обучение (deep learning). Глубокие нейронные сети применяются для решения широкого класса практических задач распознавания, классификации, предсказания, обработки и анализа естественных языков и многих других.

Глубокими нейронными сетями называются такие сети, которые имеют в своем составе большое число скрытых слоев нейронов, и, следовательно, суммарно большое число нейронов.

Задачу обучения нейронной сети можно трактовать как оценивание параметров этой сети по некоторым полученным извне наборам данных (наблюдениям), которые называются обучающими наборами данными. Параметрами сети являются веса связей между её нейронами. Так как по определению глубокой сети число входящих в неё нейронов велико, то, соответственно, велико и число «оцениваемых» параметров (весов).

В связи с большим числом параметров (весов) возникают проблемы применимости методов оценивания с использованием традиционных методов вычисления градиента функции потерь (критерия) для поиска экстремальных значений. Эти проблемы, связаны, во-первых, с невозможностью вывода аналитического выражения градиента для модели со столь большим числом параметров (сотни тысяч, миллионы параметров / весов) и столь сложной структурой как нейронная сеть. Во-вторых, методы приближенного вычисления градиента не позволяют достичь удовлетворительной точности для обеспечения сходимости оптимизационной процедуры к искомому решению.

Программный метод автоматического дифференцирования или также называемый метод обратного распространения ошибки основан на правиле дифференцирования сложной функции — «правиле цепи» («chain rule»), и предполагает определения производной для каждой операции используемой системы компьютерной алгебры. Данный метод позволяет вычислять градиент быстро и точно, не программируя явно его вычисления. Отсюда и название метода — автоматическое дифференцирование. Следует отметить, очевидно, что с помощью этого метода также можно вычислять и производные высших порядков быстро и без потери точности.

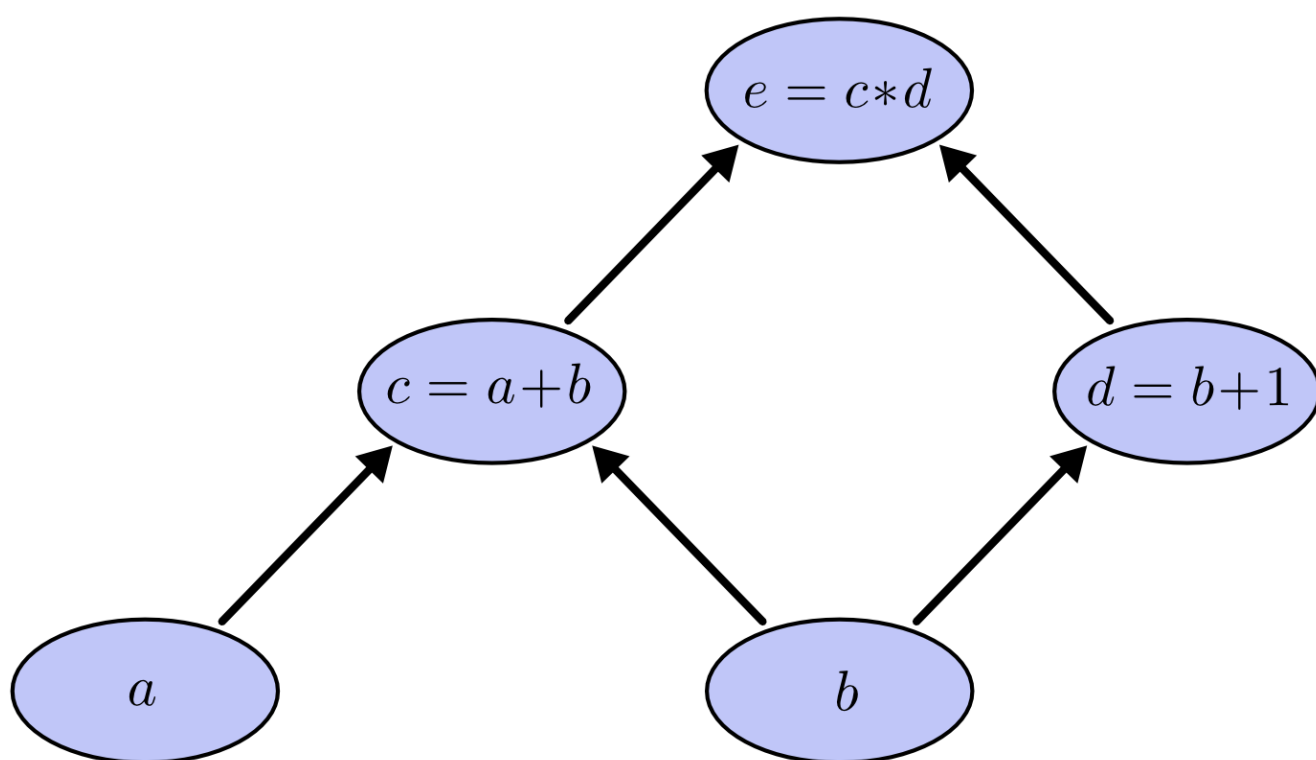


Рис. 1. Простой пример вычислительного графа [3].

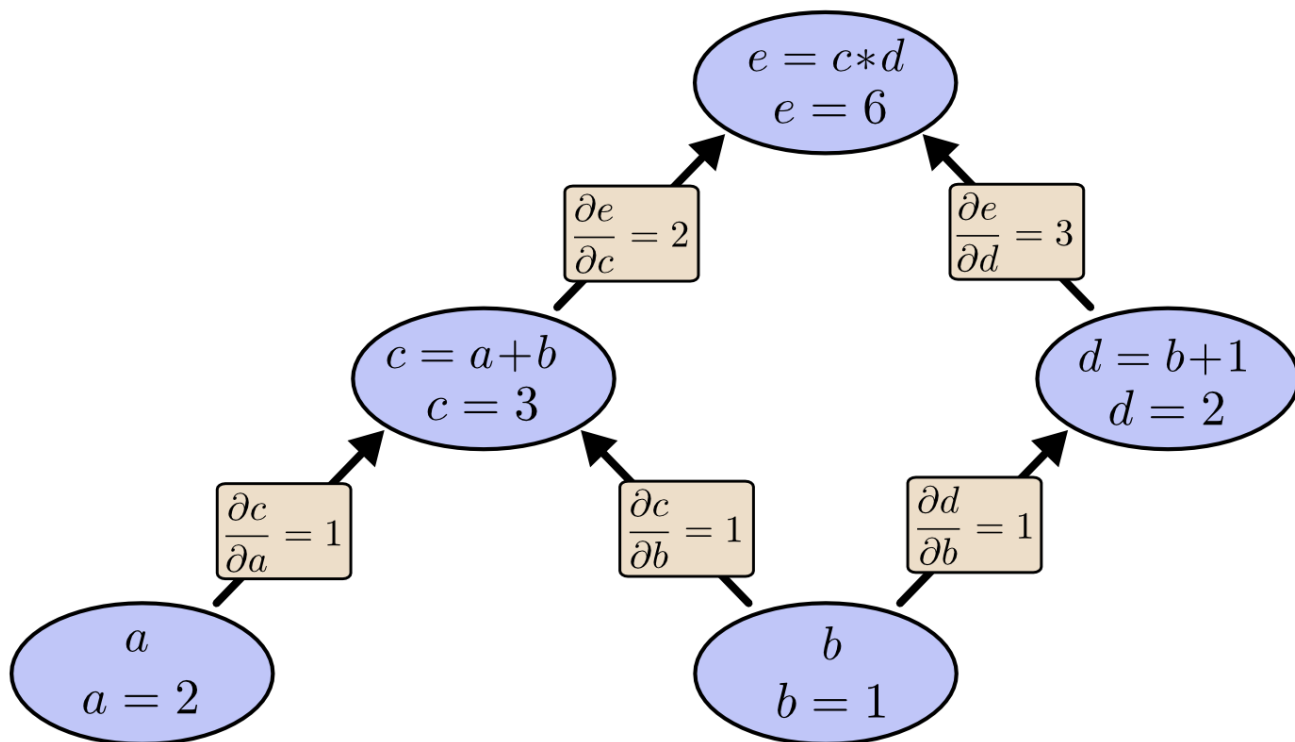


Рис. 2. Пример вычислительного графа с определением производных [3].

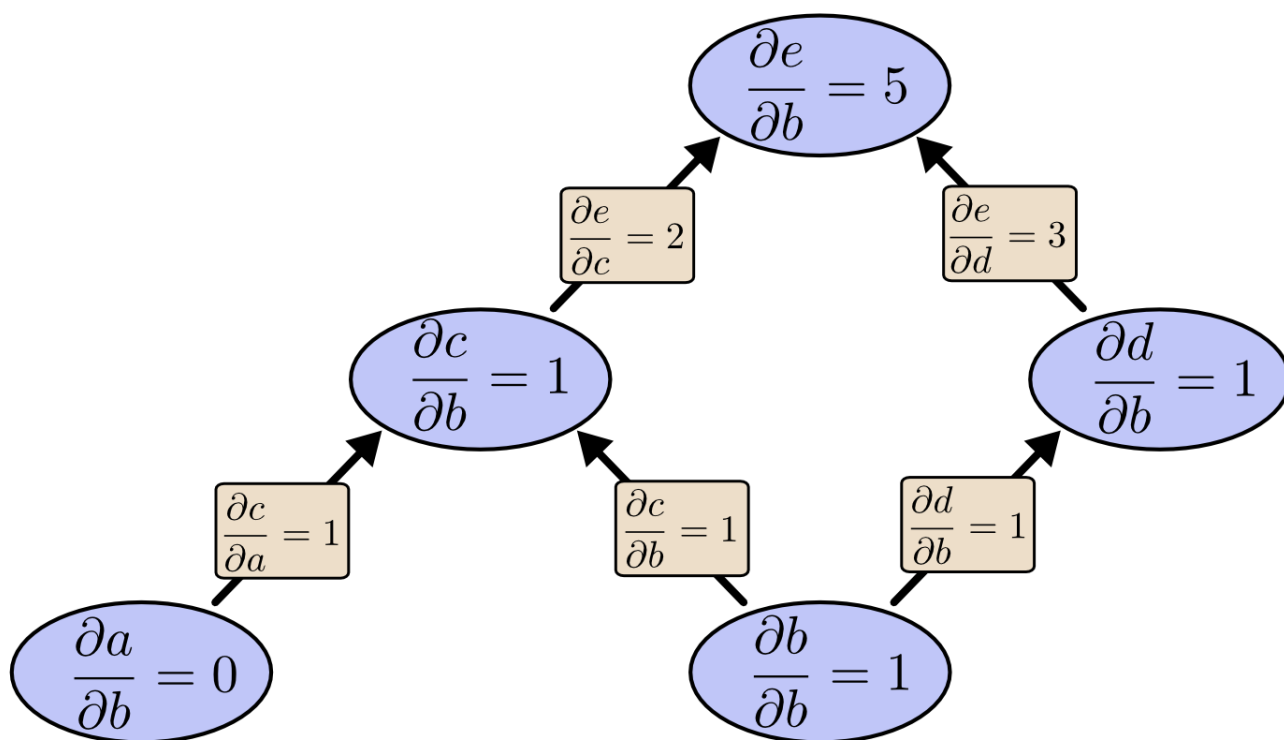


Рис. 3. Вычисление производной графа [3].

Наиболее популярные системы, в которых реализовано автоматическое дифференцирование: TensorFlow [5], Theano [6], Torch[7]. Существует большое число других систем и средств. В данной работе используется система TensorFlow.

## 2.3 Программные аспекты реализации вычислений

В данной работе используется библиотека для глубинного машинного обучения и система компьютерной алгебры TensorFlow. В этой системе всякая вычислительная программа является ориентированным (вычислительным) графом, в котором вершины являются операциями или данными, а ребра указывают направления «движения» данных. Основной структурой данных является Tensor — обобщение скаляров, векторов-столбцов, строк, квадратных и прямоугольных матриц и вообще любого многомерного массива. Отсюда и название системы «TensorFlow» — «поток тензоров».

Программу, использующую TensorFlow, в простейшем случае можно условно разделить на две части: в первой части определяется вычислительный граф, во второй части этот граф запускается, выполняется. Создание графа — процесс относительно медленный и занимает единицы, а может и десятки секунд, этот процесс можно сравнить с компиляцией. Зато по успешному завершению созданию графа получаем быструю, эффективную, параллельную вычислительную программу, которая в подавляющем большинстве случаев будет превосходить по скорости программы, написанные за некоторое короткое время с нуля на языке C/C++.

Система TensorFlow использует результаты теории графов и позволяет эффективно распараллеливать алгоритмы. К тому же в системе заложен функционал, позволяющий производить вычисления распределенно, на нескольких машинах.

### 3. Результаты экспериментальных модельных исследований

#### 3.1 Пример 1

Рассмотрим следующую модель.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) &= \begin{pmatrix} -\theta_1 & 0 \\ 0 & -\theta_2 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{u}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{w}(t), \\ \mathbf{y}(t_k) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k), \\ \mathbf{x}(t) &= \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(t_k) = \begin{bmatrix} y_1(t_k) \\ y_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ \mathbf{v}(t_k) &= \begin{bmatrix} v_1(t_k) \\ v_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ R = Q = P_0 &= \begin{pmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{x}}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$\theta = (\theta_1 \ \theta_2)$  — вектор оцениваемых параметров.

$\theta^* = (1.0 \ 1.0)$  — истинные значения параметров.

Число параметров  $s = 2$ .

Входное воздействие — ступенчатая функция

$$\mathbf{u}(t) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 10 & 10 \end{pmatrix}^T, & t > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^T, & t = 0 \end{cases}$$

Проведем процедуру оценивания параметров по однократному плану по смоделированному отклику из некоторого начального приближения по пара-



метрам.

Истинные значения параметров

$$\theta^* = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

Начальное приближение

$$\theta_0 = \begin{bmatrix} 0.8 & 1.2 \end{bmatrix}$$

Начальное значение критерия

$$\chi(\theta_0) = 2769.273739$$

Найденные значения параметров

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 1.003001 & 0.99958 \end{bmatrix}$$

Значение критерия

$$\chi(\hat{\theta}) = -250.997660$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве параметров

$$\frac{||\theta^* - \hat{\theta}||}{||\theta^*||} = 0.002143$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве откликов

$$\frac{||y^* - \hat{y}||}{||y^*||} = 0.092642$$

## 3.2 Пример 2

Рассмотрим следующую модель.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{pmatrix} \theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_2 \end{pmatrix} \mathbf{u}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{w}(t),$$

$$\mathbf{y}(t_k) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k),$$

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(t_k) = \begin{bmatrix} y_1(t_k) \\ y_2(t_k) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{v}(t_k) = \begin{bmatrix} v_1(t_k) \\ v_2(t_k) \end{bmatrix},$$

$$R = Q = P_0 = \begin{pmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{x}}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\theta = (\theta_1 \ \theta_2)$  — вектор оцениваемых параметров.

$\theta^* = (1.0 \ 1.0)$  — истинные значения параметров.

Число параметров  $s = 2$ .

Входное воздействие — ступенчатая функция

$$\mathbf{u}(t) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 10 & 10 \end{pmatrix}^T, & t > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^T, & t = 0 \end{cases}$$

Истинные значения параметров

$$\theta^* = [1.0 \ 1.0]$$

Начальное приближение

$$\theta_0 = [0.8 \ 1.2]$$

Начальное значение критерия

$$\chi(\theta_0) = 3224.659807$$

Найденные значения параметров

$$\hat{\theta} = [1.002112 \ 1.000367]$$

Значение критерия

$$\chi(\hat{\theta}) = -249.821799$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве параметров

$$\frac{||\theta^* - \hat{\theta}||}{||\theta^*||} = 0.001516$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве откликов

$$\frac{||y^* - \hat{y}||}{||y^*||} = 0.070676$$

### 3.3 Пример 3

Рассмотрим следующую модель.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{u}(t) + \begin{pmatrix} \theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_2 \end{pmatrix} \mathbf{w}(t), \\ \mathbf{y}(t_k) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k), \\ \mathbf{x}(t) &= \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(t_k) = \begin{bmatrix} y_1(t_k) \\ y_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ \mathbf{v}(t_k) &= \begin{bmatrix} v_1(t_k) \\ v_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ R = Q = P_0 &= \begin{pmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{x}}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$\theta = (\theta_1 \ \theta_2)$  — вектор оцениваемых параметров.

$\theta^* = (1.0 \ 1.0)$  — истинные значения параметров.

Число параметров  $s = 2$ .

Входное воздействие — ступенчатая функция

$$\mathbf{u}(t) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 10 & 10 \end{pmatrix}^T, & t > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^T, & t = 0 \end{cases}$$

Истинные значения параметров

$$\theta^* = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

Начальное приближение

$$\theta_0 = \begin{bmatrix} 0.8 & 1.2 \end{bmatrix}$$

Начальное значение критерия

$$\chi(\theta_0) = -261.700935$$

Найденные значения параметров

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 0.113155 & 0.435291 \end{bmatrix}$$

Значение критерия

$$\chi(\hat{\theta}) = -269.247378$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве параметров

$$\frac{\|\theta^* - \hat{\theta}\|}{\|\theta^*\|} = 0.743435$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве откликов

$$\frac{\|y^* - \hat{y}\|}{\|y^*\|} = 0.277032$$

В данном примере в результатах наблюдается крайне высокий уровень погрешности в силу того, что оцениваются параметры матрицы  $G$  — матрицы влияния возмущений объекта на его состояние. Параметры, входящие в эту матрицу плохо поддаются оценке. Возможная мера, которую можно принять

для улучшения оценок, является оценивание с использованием предварительно синтезированных оптимальных входных сигналах, то есть предварительное планирование входных сигналов.

### 3.4 Пример 4

Рассмотрим следующую модель.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{u}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{w}(t), \\ \mathbf{y}(t_k) &= \begin{pmatrix} \theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_2 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k), \\ \mathbf{x}(t) &= \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(t_k) = \begin{bmatrix} y_1(t_k) \\ y_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ \mathbf{v}(t_k) &= \begin{bmatrix} v_1(t_k) \\ v_2(t_k) \end{bmatrix}, \\ R = Q = P_0 &= \begin{pmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{x}}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$\theta = (\theta_1 \ \theta_2)$  — вектор оцениваемых параметров.

$\theta^* = (1.0 \ 1.0)$  — истинные значения параметров.

Число параметров  $s = 2$ .

Входное воздействие — ступенчатая функция

$$\mathbf{u}(t) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 10 & 10 \end{pmatrix}^T, & t > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^T, & t = 0 \end{cases}$$

Истинные значения параметров

$$\theta^* = [1.0 \ 1.0]$$

Начальное приближение

$$\theta_0 = \begin{bmatrix} 0.9 & 1.1 \end{bmatrix}$$

Начальное значение критерия

$$\chi(\theta_0) = 625.662354$$

Найденные значения параметров

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 1.000843 & 1.002367 \end{bmatrix}$$

Значение критерия

$$\chi(\hat{\theta}) = -247.845003$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве параметров

$$\frac{\|\theta^* - \hat{\theta}\|}{\|\theta^*\|} = 0.001777$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве откликов

$$\frac{\|y^* - \hat{y}\|}{\|y^*\|} = 0.082818$$

### 3.5 Пример 5

Рассмотрим следующую модель.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{u}(t) + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{w}(t),$$

$$\mathbf{y}(t_k) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x}(t_k) + \mathbf{v}(t_k),$$

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(t_k) = \begin{bmatrix} y_1(t_k) \\ y_2(t_k) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{v}(t_k) = \begin{bmatrix} v_1(t_k) \\ v_2(t_k) \end{bmatrix},$$

$$R = P_0 = \begin{pmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{x}_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} \theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_2 \end{pmatrix}$$

$\theta = (\theta_1 \ \theta_2)$  — вектор оцениваемых параметров.

$\theta^* = (1.0 \ 1.0)$  — истинные значения параметров.

Число параметров  $s = 2$ .

Входное воздействие — ступенчатая функция

$$\mathbf{u}(t) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 10 & 10 \end{pmatrix}^T, & t > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^T, & t = 0 \end{cases}$$

Истинные значения параметров

$$\theta^* = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.1 \end{bmatrix}$$

Начальное приближение

$$\theta_0 = \begin{bmatrix} 0.11 & 0.09 \end{bmatrix}$$

Начальное значение критерия

$$\chi(\theta_0) = -222.594991$$

Найденные значения параметров

$$\hat{\theta} = \begin{bmatrix} 0.00159 & 0.003004 \end{bmatrix}$$

Значение критерия

$$\chi(\hat{\theta}) = -262.500586$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве параметров

$$\frac{||\theta^* - \hat{\theta}||}{||\theta^*||} = 0.977059$$

Относительная погрешность оценивания в пространстве откликов

$$\frac{||y^* - \hat{y}||}{||y^*||} = 0.663012$$

## Заключение

Как было показано, результаты экспериментальных модельных исследований хорошо согласуются с теоретическими положениями об эффективности алгоритма оценивания параметров динамических стохастических линейных непрерывно-дискретных систем методом максимального правдоподобия при выполнении соответствующих указанных априорных предположений.

А использование в оптимизационной процедуре градиента, вычисленного методом автоматического дифференцирования, позволяет получить оценки, погрешность которых сопоставима с погрешностью оценок, полученных с использованием аналитического выражения градиента.

## Список литературы

- [1] Активная параметрическая идентификация стохастических линейных систем: монография / В.И. Денисов, В.М. Чубич, О.С. Черникова, Д.И. Бобылева. — Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2009. — 192 с. (Серия «Монографии НГТУ»).
- [2] Активная параметрическая идентификация стохастических динамических систем. Оценивание параметров: учеб. пособие / В.М. Чубич, Е.В. Филиппова. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2016. — 63 с.
- [3] Chris Olah. "Calculus on Computational Graphs: Backpropagation", colah's blog. August 31, 2015. URL: [colah.github.io/posts/2015-08-Backprop](https://colah.github.io/posts/2015-08-Backprop)



- [4] A. Baydin, B. Pearlmutter, A. Radul, J. Siskind. Automatic Differentiation in Machine Learning: a Survey. arXiv:0706.1234 [cs.SC]
- [5] Martín Abadi, Ashish Agarwal, Paul Barham, et al. TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, 2015. Software available from tensorflow.org. arXiv:1603.04467 [cs.DC]
- [6] J. Bergstra, O. Breuleux, F. Bastien, et al. “Theano: A CPU and GPU Math Expression Compiler”. Proceedings of the Python for Scientific Computing Conference (SciPy) 2010. June 30 - July 3, Austin, TX
- [7] Collobert, Ronan, Koray Kavukcuoglu, and Clément Farabet. "Torch7: A matlab-like environment for machine learning." BigLearn, NIPS Workshop. No. EPFL-CONF-192376. 2011.

## Приложение А Исходные тексты

```
import math
import os
import tensorflow as tf
import control
import numpy as np
from tensorflow.contrib.distributions import MultivariateNormalFullCovariance
import scipy

os.environ['TF_CPP_MIN_LOG_LEVEL'] = '3'

class Model(object):

    # TODO: introduce some more default argument values, check types, cast if
    # necessary
    def __init__(self, F, C, G, H, x0_mean, x0_cov, w_cov, v_cov, th):
        """
        Arguments are all callables (functions) of 'th' returning python lists
        except for 'th' itself (of course)
        """

        # TODO: evaluate and cast everything to numpy matrices first
        # TODO: cast floats, ints to numpy matrices
        # TODO: allow both constant matrices and callables

        # store arguments, after that check them
        self.__F = F
```

```

self.__C = C
self.__G = G
self.__H = H
self.__x0_mean = x0_mean
self.__x0_cov = x0_cov
self.__w_cov = w_cov
self.__v_cov = v_cov
self.__th = th

# evaluate all functions
th = np.array(th)
F = np.array(F(th))
C = np.array(C(th))
H = np.array(H(th))
G = np.array(G(th))
w_cov = np.array(w_cov(th))    # Q
v_cov = np.array(v_cov(th))    # R
x0_m = np.array(x0_mean(th))
x0_cov = np.array(x0_cov(th))  # P_0

# get dimensions and store them as well
self.__n = n = F.shape[0]
self.__m = m = H.shape[0]
self.__p = p = G.shape[1]
self.__r = r = C.shape[1]

# generate means
w_mean = np.zeros([p, 1], np.float64)
v_mean = np.zeros([m, 1], np.float64)

# and store them
self.__w_mean = w_mean
self.__v_mean = v_mean

# check conformability
u = np.ones([r, 1])
# generate random vectors
# squeeze, because mean must be one dimensional
x = np.random.multivariate_normal(x0_m.squeeze(), x0_cov)
w = np.random.multivariate_normal(w_mean.squeeze(), w_cov)
v = np.random.multivariate_normal(v_mean.squeeze(), v_cov)

# shape them as column-vectors
x = x.reshape([n, 1])
w = w.reshape([p, 1])
v = v.reshape([m, 1])

# if model is not conformable, exception would be raised (throw) here
F * x + C * u + G * w
H * x + v

# check controllability, stability, observability
self.__validate()

```

```

        # if the execution reached here, all is fine so
        # define corresponding computational tensorflow graphs
        self.__define_observations_simulation()
        self.__define_likelihood_computation()

def __define_observations_simulation(self):
    # TODO: reduce code not to create extra operations

    self.__sim_graph = tf.Graph()
    sim_graph = self.__sim_graph

    r = self.__r
    m = self.__m
    n = self.__n
    p = self.__p

    x0_mean = self.__x0_mean
    x0_cov = self.__x0_cov

    with sim_graph.as_default():

        th = tf.placeholder(tf.float64, shape=[None], name='th')

        # TODO: this should be continuous function of time
        # but try to let pass array also
        u = tf.placeholder(tf.float64, shape=[r, None], name='u')

        t = tf.placeholder(tf.float64, shape=[None], name='t')

        # TODO: refactor

        # FIXME: gradient of py_func is None
        # TODO: embed function itself in the graph, must rebuild the graph
        # if the structure of the model change
        # use tf.convert_to_tensor
        F = tf.convert_to_tensor(self.__F(th), tf.float64)
        F.set_shape([n, n])

        C = tf.convert_to_tensor(self.__C(th), tf.float64)
        C.set_shape([n, r])

        G = tf.convert_to_tensor(self.__G(th), tf.float64)
        G.set_shape([n, p])

        H = tf.convert_to_tensor(self.__H(th), tf.float64)
        H.set_shape([m, n])

        x0_mean = tf.convert_to_tensor(x0_mean(th), tf.float64)
        x0_mean = tf.squeeze(x0_mean)

        x0_cov = tf.convert_to_tensor(x0_cov(th), tf.float64)
        x0_cov.set_shape([n, n])

```

```

x0_dist = MultivariateNormalFullCovariance(x0_mean, x0_cov,
                                             name='x0_dist')

Q = tf.convert_to_tensor(self.__w_cov(th), tf.float64)
Q.set_shape([p, p])

w_mean = self.__w_mean.squeeze()
w_dist = MultivariateNormalFullCovariance(w_mean, Q, name='w_dist')

R = tf.convert_to_tensor(self.__v_cov(th), tf.float64)
R.set_shape([m, m])
v_mean = self.__v_mean.squeeze()
v_dist = MultivariateNormalFullCovariance(v_mean, R, name='v_dist')

def sim_obs(x):
    v = v_dist.sample()
    v = tf.reshape(v, [m, 1])
    y = H @ x + v # the syntax is valid for Python >= 3.5
    return y

def sim_loop_cond(x, y, t, k):
    N = tf.stack([tf.shape(t)[0]])
    N = tf.reshape(N, ())
    return tf.less(k, N-1)

def sim_loop_body(x, y, t, k):

    # TODO: this should be function of time
    u_t_k = tf.slice(u, [0, k], [r, 1])

    def state_propagate(x, t):
        w = w_dist.sample()
        w = tf.reshape(w, [p, 1])
        Fx = tf.matmul(F, x, name='Fx')
        Cu = tf.matmul(C, u_t_k, name='Cu')
        Gw = tf.matmul(G, w, name='Gw')
        dx = Fx + Cu + Gw
        return dx

    tk = tf.slice(t, [k], [2], 'tk')

    x_k = x[:, -1]
    x_k = tf.reshape(x_k, [n, 1])

    # decreased default tolerance to avoid max_num_steps exceeded
    # error may increase max_num_steps as an alternative
    x_k = tf.contrib.integrate.odeint(state_propagate, x_k, tk,
                                      name='state_propagate',
                                      rtol=1e-4,
                                      atol=1e-10)

    x_k = x_k[-1] # last state (last row)

```

```

        y_k = sim_obs(x_k)

        # TODO: stack instead of concat
        x = tf.concat([x, x_k], 1)
        y = tf.concat([y, y_k], 1)

        k = k + 1

    return x, y, t, k

x = x0_dist.sample(name='x0_sample')
x = tf.reshape(x, [n, 1], name='x')

# this zeroth measurement should be thrown away
y = sim_obs(x)
k = tf.constant(0, name='k')

shape_invariants = [tf.TensorShape([n, None]),
                    tf.TensorShape([m, None]),
                    t.get_shape(),
                    k.get_shape()]

sim_loop = tf.while_loop(sim_loop_cond, sim_loop_body,
                        [x, y, t, k], shape_invariants,
                        name='sim_loop')

self.__sim_loop_op = sim_loop

# defines graph
def __define_likelihood_computation(self):

    self.__lik_graph = tf.Graph()
    lik_graph = self.__lik_graph

    r = self.__r
    m = self.__m
    n = self.__n
    p = self.__p

    x0_mean = self.__x0_mean
    x0_cov = self.__x0_cov

    with lik_graph.as_default():
        # FIXME: Don't Repeat Yourself (in simulation and here)
        th = tf.placeholder(tf.float64, shape=[None], name='th')
        u = tf.placeholder(tf.float64, shape=[r, None], name='u')
        t = tf.placeholder(tf.float64, shape=[None], name='t')
        y = tf.placeholder(tf.float64, shape=[m, None], name='y')

        N = tf.stack([tf.shape(t)[0]])
        N = tf.reshape(N, ())

```

```

F = tf.convert_to_tensor(self.__F(th), tf.float64)
F.set_shape([n, n])

C = tf.convert_to_tensor(self.__C(th), tf.float64)
C.set_shape([n, r])

G = tf.convert_to_tensor(self.__G(th), tf.float64)
G.set_shape([n, p])

H = tf.convert_to_tensor(self.__H(th), tf.float64)
H.set_shape([m, n])

x0_mean = tf.convert_to_tensor(x0_mean(th), tf.float64)
x0_mean.set_shape([n, 1])

P_0 = tf.convert_to_tensor(x0_cov(th), tf.float64)
P_0.set_shape([n, n])

Q = tf.convert_to_tensor(self.__w_cov(th), tf.float64)
Q.set_shape([p, p])

R = tf.convert_to_tensor(self.__v_cov(th), tf.float64)
R.set_shape([m, m])

I = tf.eye(n, n, dtype=tf.float64)

def lik_loop_cond(k, P, S, t, u, x, y):
    return tf.less(k, N-1)

def lik_loop_body(k, P, S, t, u, x, y):

    # TODO: this should be function of time
    u_t_k = tf.slice(u, [0, k], [r, 1])

    # k+1, cause zeroth measurement should not be taken into account
    y_k = tf.slice(y, [0, k+1], [m, 1])

    t_k = tf.slice(t, [k], [2], 't_k')

    # TODO: extract Kalman filter to a separate class
    def state_predict(x, t):
        Fx = tf.matmul(F, x, name='Fx')
        Cu = tf.matmul(C, u_t_k, name='Cu')
        dx = Fx + Cu
        return dx

    def covariance_predict(P, t):
        GQtG = tf.matmul(G @ Q, G, transpose_b=True)
        PtF = tf.matmul(P, F, transpose_b=True)
        dP = tf.matmul(F, P) + PtF + GQtG
        return dP

    x = tf.contrib.integrate.odeint(state_predict, x, t_k,

```

```

name='state_predict')

x = x[-1]

P = tf.contrib.integrate.odeint(covariance_predict, P, t_k,
                                name='covariance_predict')

P = P[-1]

E = y_k - tf.matmul(H, x)

B = tf.matmul(H @ P, H, transpose_b=True) + R
invB = tf.matrix_inverse(B)

K = tf.matmul(P, H, transpose_b=True) @ invB

S_k = tf.matmul(E, invB @ E, transpose_a=True)
S_k = 0.5 * (S_k + tf.log(tf.matrix_determinant(B)))

S = S + S_k

# state update
x = x + tf.matmul(K, E)

# covariance update
P = (I - K @ H) @ P

k = k + 1

return k, P, S, t, u, x, y

k = tf.constant(0, name='k')
P = P_0
S = tf.constant(0.0, dtype=tf.float64, shape=[1, 1], name='S')
x = x0_mean

# TODO: make a named tuple of named list
lik_loop = tf.while_loop(lik_loop_cond, lik_loop_body,
                        [k, P, S, t, u, x, y], name='lik_loop')

dS = tf.gradients(lik_loop[2], th)

self.__lik_loop_op = lik_loop
self.__dS = dS

def __isObservable(self, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th
    F = np.array(self.__F(th))
    C = np.array(self.__C(th))
    n = self.__n
    obsv_matrix = control.observ(F, C)
    rank = np.linalg.matrix_rank(obsv_matrix)
    return rank == n

```

```

def __isControllable(self, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th
    F = np.array(self.__F(th))
    C = np.array(self.__C(th))
    n = self.__n
    ctrb_matrix = control.ctrb(F, C)
    rank = np.linalg.matrix_rank(ctrb_matrix)
    return rank == n

def __isStable(self, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th
    F = np.array(self.__F(th))
    eigv = np.linalg.eigvals(F)
    real_parts = np.real(eigv)
    return np.all(real_parts < 0)

def __validate(self, th=None):
    # FIXME: do not raise exceptions
    # TODO: prove, print matrices and their criteria
    if not self.__isControllable(th):
        # raise Exception(''Model is not controllable. Set different
        #                      structure or parameters values'')
        pass

    if not self.__isStable(th):
        # raise Exception(''Model is not stable. Set different structure or
        #                      parameters values'')
        pass

    if not self.__isObservable(th):
        # raise Exception(''Model is not observable. Set different
        #                      structure or parameters values'')
        pass

def sim(self, u, t, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th

    self.__validate(th)
    g = self.__sim_graph

    if t.shape[0] != u.shape[1]:
        raise Exception(''t.shape[0] != u.shape[1]'')

    # run simulation graph
    with tf.Session(graph=g) as sess:
        t_ph = g.get_tensor_by_name('t:0')
        th_ph = g.get_tensor_by_name('th:0')
        u_ph = g.get_tensor_by_name('u:0')
        rez = sess.run(self.__sim_loop_op, {th_ph: th, t_ph: t, u_ph: u})

```



```

    return rez

def lik(self, t, u, y, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th

    # to numpy 1D array
    th = np.array(th).squeeze()

    # self.__validate(th)
    g = self.__lik_graph

    if t.shape[0] != u.shape[1]:
        raise Exception('t.shape[0] != u.shape[1]')

    # run lik graph
    with tf.Session(graph=g) as sess:
        t_ph = g.get_tensor_by_name('t:0')
        th_ph = g.get_tensor_by_name('th:0')
        u_ph = g.get_tensor_by_name('u:0')
        y_ph = g.get_tensor_by_name('y:0')
        rez = sess.run(self.__lik_loop_op, {th_ph: th, t_ph: t, u_ph: u,
                                             y_ph: y})

    N = len(t)
    m = y.shape[0]
    S = rez[2]
    S = S + N*m * 0.5 + np.log(2*math.pi)

    return S

def __L(self, th, t, u, y):
    return self.lik(t, u, y, th)

def __dL(self, th, t, u, y):
    return self.dL(t, u, y, th)

def dL(self, t, u, y, th=None):
    if th is None:
        th = self.__th

    # to 1D numpy array
    th = np.array(th).squeeze()

    # self.__validate(th)
    g = self.__lik_graph

    if t.shape[0] != u.shape[1]:
        raise Exception('t.shape[0] != u.shape[1]')

    # run lik graph
    with tf.Session(graph=g) as sess:
        t_ph = g.get_tensor_by_name('t:0')

```

```

        th_ph = g.get_tensor_by_name('th:0')
        u_ph = g.get_tensor_by_name('u:0')
        y_ph = g.get_tensor_by_name('y:0')
        rez = sess.run(self.__dS, {th_ph: th, t_ph: t, u_ph: u, y_ph: y})

    return rez[0]

def mle_fit(self, th, t, u, y):
    # TODO: call slsqp
    th0 = th
    th = scipy.optimize.minimize(self.__L, th0, args=(t, u, y),
                                jac=self.__dL, options={'disp': True})
    return th

```